



рис.1 Карты вычисленной деформационной плотности для алмаза, нитрида бора и  $BC_2N$

Результат расчета деформационной плотности гипотетического тройного соединения  $BC_2N$  показывает, что имеет место дальнейшее усложнение карты деформационной плотности по сравнению с алмазом и BN. Очертания этой плоскости говорят о том, что углерод выполняет роли аниона по отношению к иону бора и катиона по отношению к иону азота. Следует ожидать, что прочность связи в  $BC_2N$  будет еще уменьшена по сравнению с BN. Того же самого следует ожидать и по отношению к твердости этих кристаллов, вместе с тем исследователи относят  $BC_2N$  к супертвердым кристаллам.

Алмаз, нитрид бора и гипотетические кристаллы  $BC_2N$  с различными структурными модификациями относятся к супертвердым соединениям. Нитрид бора, кроме того более теплостоек и имеет достаточно интересные полупроводниковые свойства. Что можно сказать о гипотетическом кристалле  $BC_2N$  со структурой типа халькопирита на основании наших первопринципных исследований химической связи? Характер связывания ионов в этом кристалле достаточно сложный и существенно отличается от связывания ионов в кристаллах алмаза и нитрида бора. Сила связывания ожидается более слабой, чем у алмаза и нитрида бора, что должно привести к уменьшению твердости. Можно ли на этом основании сказать, что эти кристаллы менее интересны? Не стоит спешить с выводами. Необычный характер химического связывания, говорит о том, что электронные свойства  $BC_2N$  будут существенно отличаться от электронных свойств алмаза и нитрида бора. А это может оказаться очень интересным и для полупроводниковой электроники.

Список публикаций:

- [1] Басалаев, Ю.М. Электронное строение тройных алмазободобных соединений со структурой халькопирита: монография/Ю.М.Басалаев, А.С.Поплавной. – Кемерово: «ИИТ». – 2009, 225 с.
- [2] Федоров, И.А. Практическое руководство по применению пакета CRYSTAL09 к расчету электронного строения кристаллов и молекул: эл. учеб.-метод. пособие/И.А. Федоров, Ю.М.Басалаев, Т.П.Федорова. – Кемерово: Изд-во КемГУ, 2014. – 46 с.
- [3] Интернет-ресурс [www.crystal.unito.it/Basis Sets/ptable.html](http://www.crystal.unito.it/Basis%20Sets/ptable.html).

## Зависимость адсорбции молекул СО на поверхности нанокластеров палладия

**Русалев Юрий Владимирович**

**Будник Андрей Петрович**

**МИЦ «Интеллектуальные материалы, Южного федерального университета**

**Гуда Александр Александрович, к.ф.-м.н.**

**[yuri.rusalev@gmail.com](mailto:yuri.rusalev@gmail.com)**

Палладий является очень эффективным катализатором для окислации СО. Эта реакция очень важна для снижения промышленных и автомобильных выхлопов, а также является отличной моделью для фундаментальных исследований катализаторов на базе переходных металлов. В связи с этим, их исследование является весьма актуальным.

Нанокластеры это переходная стадия между отдельными молекулярными соединениями и твердыми телами. Физические и химические свойства кластеров сильно зависят от размеров, а значит могут быть легко изменены. Это особенно важно для производства наноразмерных материалов и для гетерогенного катализа. В данном случае важно понять, как меняется активность палладия по отношению к СО с изменением размера и формы кластера. С точки зрения теории, квантово-механические методы, основанные на теории функционала плотности, являются мощным инструментом для расчёта и теоретического предсказания. В данной работе мы использовали два различных программных комплекса, а именно VASP 5.2 и ADF-2014 для расчёта ИК-спектров, которые и смогут объяснить зависимость адсорбции молекул СО на поверхности кластеров палладия.

В ходе данной работы были построены симметричные модели различных размеров кластеров палладия, наиболее похожие на снимки с электронного микроскопа частиц палладия, полученных с помощью коллоидной химии. После чего была произведена геометрическая оптимизация данных кластеров. Затем на оптимизированные модели были симметрично посажены различные количества молекул СО на различные позиции. Была произведена геометрическая оптимизация новых моделей кластеров с молекулами СО и подбор

параметров для улучшенной сходимости самосогласованной процедуры и получения физических результатов. Для полученных оптимизированных моделей были рассчитаны ИК спектры колебаний молекул СО и произведено их сравнение с литературными данными.

В результате данной работы были получены энергии и расстояния между палладием и углеродом, углеродом и кислородом, что даёт нам возможность выбрать наиболее низкоэнергетические модели для дальнейшего изучения. Кроме того, были рассчитаны частоты ИК колебаний молекул СО на поверхности кластеров палладия. Было произведено их сравнение с литературными данными. Положения и интенсивности пиков сравнимы с литературой, что означает адекватность расчётов.

Помимо теоретического исследования была разработана схема для точного смешения и подачи газов для проведения in-situ измерения ИК спектров. Предложенная схема позволит провести экспериментальные измерения сухих образцов в потоке различных газов с контролируемым давлением.

### **Ячейка для исследования катодных материалов для современных литий-ионных батарей**

***Русалев Юрий Владимирович***

***Шаповалов Виктор Васильевич***

***МИЦ «Интеллектуальные материалы, Южного федерального университета***

***Гуда Александр Александрович, к.ф.-м.н.***

***yuri.rusalev@gmail.com***

Литий-ионные аккумуляторы прочно вошли в повседневную жизнь человека. Несмотря на это, существует целый ряд проблем, связанный с их использованием. Например, старение материалов внутри батареи, необходимость специальных циклов зарядки и разрядки для продолжительной службы, небольшая ёмкость, высокая стоимость, а также маленький температурный диапазон эксплуатации. Что бы решить все эти проблемы, необходимо понимать, что происходит с материалами внутри аккумулятора во время его использования. Разрабатываемая нами, ячейка позволит проводить анализ веществ внутри батареи с помощью рентгеновского излучения и электрохимических методов, что позволит нам измерять характеристики батареи in-situ.

Наша установка состоит из двух частей. Первая часть — это электроника, которая позволяет измерять такие характеристики как ёмкость, и вольт-амперные характеристики во время разрядки и зарядки аккумулятора. Блок управления основан на базе микроконтроллера архитектуры AVR ATmega 2560 с 10-битным АЦП, что позволяет нам проводить до 120 измерений в минуту с точностью 2 мВ и 1мА. Контроль силовых цепей осуществлён с помощью внешнего 8-битного ЦАП. Вдобавок ко всему, на борту устройства имеется встроенный USB-COM мост для обмена данными с специальным программным обеспечением на ПК. Разработанное ПО осуществляет контроль основных режимов работы электроники. Основными функциями являются заряд и разряд батареи, измерение ёмкости и уровня заряда, а также заряд и разряд батареи определёнными токами в нужном диапазоне напряжений.

Вторая часть — это ячейка, в которую непосредственно загружаются исследуемые материалы. Она состоит из двух алюминиевых половинок. На каждую половинку вклеено токопроводящее окошко, прозрачное для рентгеновского пучка, толщиной 100 микрон. Для данной ячейки есть возможность установки специальных окон толщиной до 300 микрон, а также металлических фольг и других тонких материалов. Две половинки соединяются с помощью тефлоновой прокладки и шести болтов.

В результате была сконструирована и изготовлена ячейка, позволяющая проводить эксперименты по рентгеновскому поглощению и дифракции на различных источниках. Данную ячейку возможно использовать не только на синхротронах и лазерах на свободных электронах, но и на лабораторных установках, благодаря тонким окнам из специальных материалов. По мимо этого была создана простейшая электроника и программное обеспечение для измерений. Также ячейку возможно использовать и с коммерческими потенциостатами, что позволяет добиться высокой точности.